

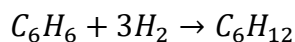
Exemple de Simulation de Procédé

1.1 Exemple de simulation d'un procédé

Considérons un schéma de procédé simple, la production de cyclohexane par hydrogénation du benzène. Le cyclohexane est un important intermédiaire pour la fabrication de fibres synthétiques (nylon), qui peut être produit par addition d'hydrogène sur le benzène.

Le schéma de procédé est représenté en figure 1. Le benzène et l'hydrogène sont mélangés à de l'hydrogène et du cyclohexane recyclés pour alimenter un réacteur catalytique à lit fixe.

La réaction a lieu en phase vapeur et s'écrit :



Alimentations		
Composition (% molaire)	benzène	hydrogène
hydrogène	0.0	97.5
azote	0.0	0.5
méthane	0.0	2.0
benzène	100.0	0.0
Débits molaires (kmol/h)	50	env. 150
Température (K)	310	310
Pression (atm)	1	23
Pompe d'alimentation	centrifuge pression de sortie=23 atm	
Préchauffeur	température de sortie 422 K perte de charge 1 atm	
Réacteur	99.8% du benzène convertis température de sortie 475 K perte de charge 1 atm.	
Refroidissement des produits	température de sortie 320K perte de charge 0.3 atm	
Séparateur haute pression	pas de perte de charge température = 322 K	
Purge	8% de la vapeur du séparateur	
Compresseur de recyclage	alternatif pression de sortie = 23 atm	
recyclage du cyclohexane	30% du liquide du séparateur	
Pompe de recyclage	centrifuge pression de sortie= 23 atm	
Colonne de distillation		
Nb d'étages théoriques (y compris condenseur et rebouilleur)	15	
Taux de reflux	1.2	
Position de l'alimentation	8eme étage (à partir du haut)	
Pression	13.5 atm	
Taux de récupération du cyclohexane dans le résidu	99.99%	
Condenseur	partiel	
Etat du distillat	vapeur	

Tableau 1

Le benzène introduit est converti à 99.8%. La chaleur de réaction pour cette réaction hautement exothermique est évacuée par de l'eau à l'état d'ébullition. L'effluent du réacteur est ensuite refroidi et séparé en deux phases

liquides et vapeur. La phase liquide est introduite dans une colonne de distillation afin d'éliminer les gaz légers dissous et de stabiliser le produit. Une partie du liquide du séparateur est recyclée au réacteur pour aider le contrôle de température.

La vapeur sortant du séparateur, essentiellement formée d'hydrogène est recyclée vers le réacteur. Une fraction de cette vapeur est purgée, pour évacuer les inerts qui "tournent" dans le procédé.

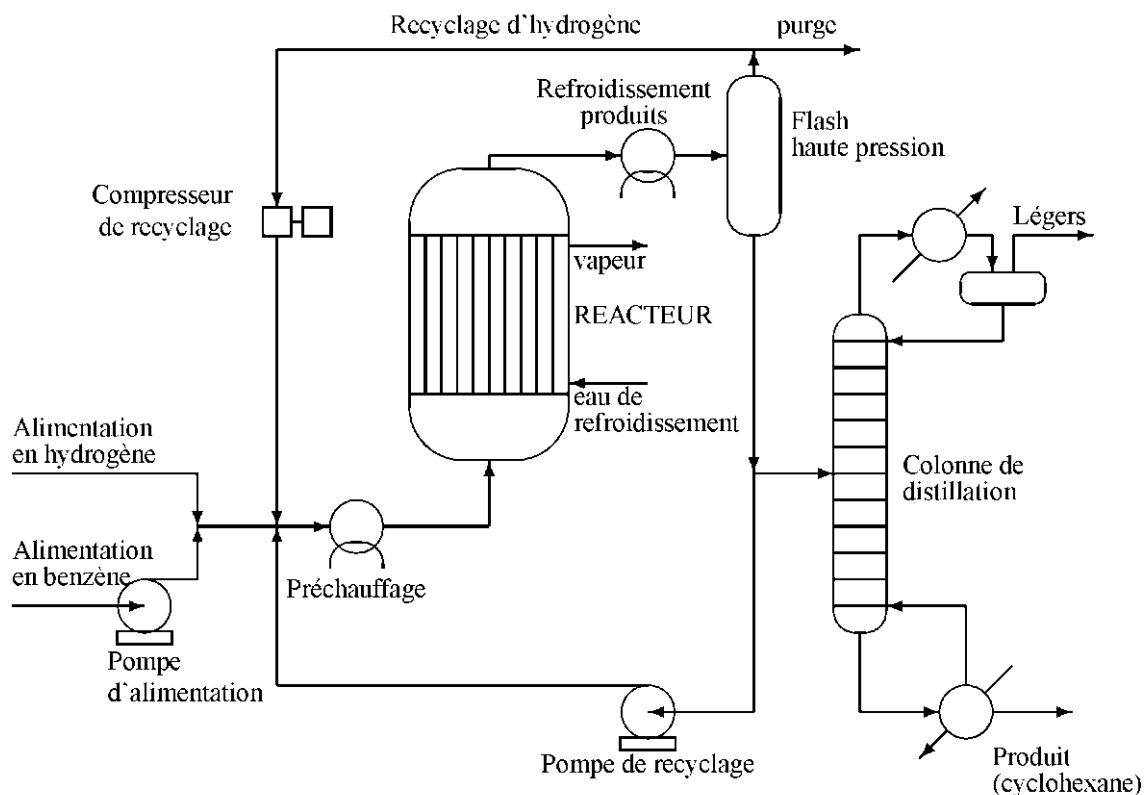
On cherche à développer un modèle de simulation pour ce procédé et à déterminer tous les produits, les débits de matière intermédiaires et la performance de chaque unité du procédé.

Les conditions opératoires du procédé sont décrites par le tableau 1.

On s'impose de plus une spécification de design : le rapport H_2/C_6H_6 dans le réacteur doit être égal à 3.3.

On ajustera le débit d'alimentation en hydrogène pour respecter cette spécification.

FIG. 1 – Hydrogénation du benzène en cyclohexane : schéma de procédé



Pour simplifier la modélisation, il est possible de regrouper les opérations unitaires en ensembles fonctionnels. Il est clair que cette description du problème ne permettra pas, par exemple, d'accéder à la puissance requise par chaque compresseur. En fait, on centre ici son intérêt sur les transformations globales de la matière. De la même façon, on ne cherche qu'à écrire un bilan énergétique global sur le réacteur (en particulier, de déterminer la quantité de chaleur à évacuer), sans faire le dimensionnement de l'échangeur de chaleur qui devra être utilisé à cette fin.

1.3.1 Construction du schéma de procédé

Lancer "Aspen Plus User Interface" puis choisir "Blank Simulation". La première opération consiste à tracer le schéma du procédé (nature et connexions des opérations unitaires). On place les opérations unitaires en choisissant d'abord leur type (colonne, réacteur...) dans les onglets du bas de page, puis en sélectionnant l'opération souhaitée. On peut aussi sélectionner l'icône la plus appropriée (le choix de l'icône n'a pas d'incidence sur le calcul). On place ensuite l'opération unitaire dans la zone de travail (bouton gauche).

Pour placer un débit de matière, on commence par sélectionner le mode "Material Streams" (en bas à gauche). Dès que l'on amène le curseur dans la zone de dessin, les connexions possibles des opérations unitaires

apparaissent. Il suffit de cliquer sur un port de sortie d'une opération, puis sur un port d'entrée d'une autre opération, pour créer le débit reliant les deux opérations.

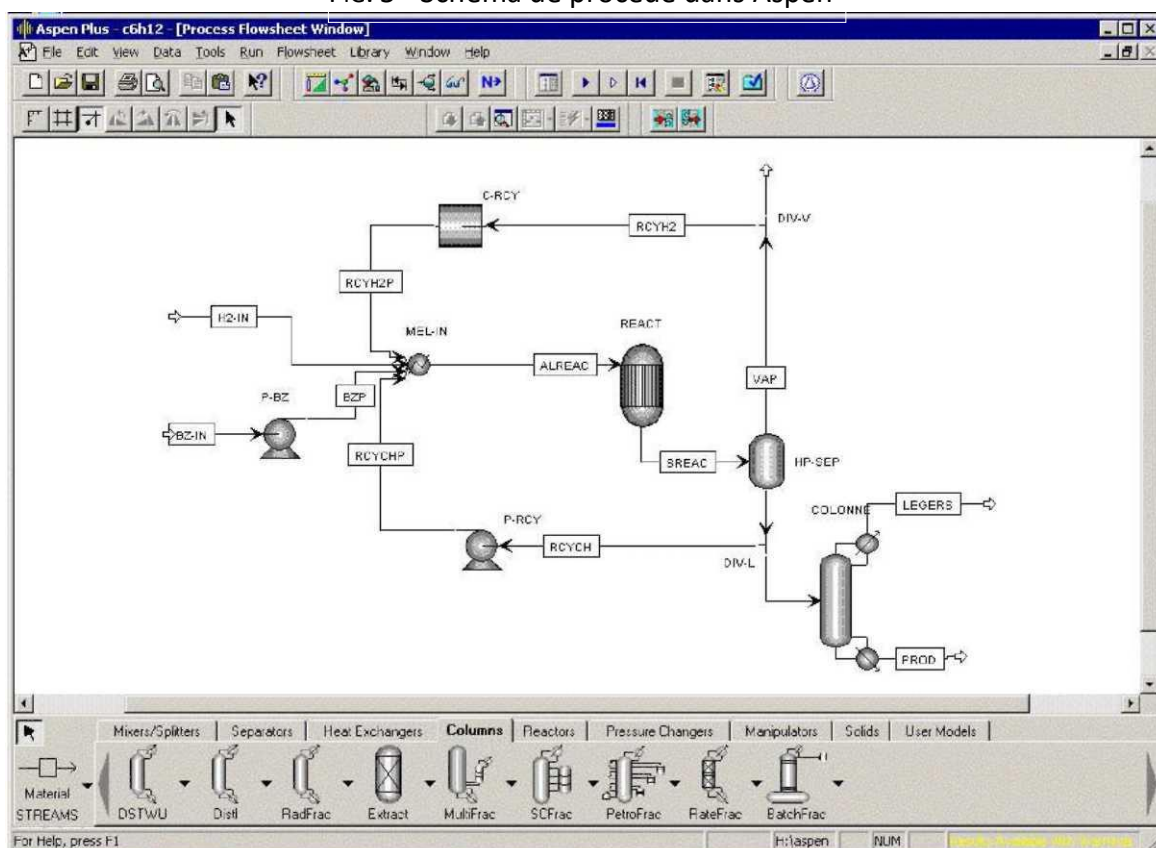
Pour créer un courant d'alimentation, on amène un débit d'une zone vide de l'écran vers un port d'entrée d'une opération. Un courant de sortie part d'un port de sortie d'une opération et se termine en un point vide de la fenêtre (extérieur du procédé). Pour sortir du mode *"Material Streams"*, cliquer sur la flèche oblique en bas à gauche, juste au-dessus de l'icône *"Material Streams"*.

Selon les options en cours (voir dans le menu déroulant *"Tools/options/flowsheet"*) les opérations et les débits placés se verront affecter automatiquement un nom, ou ce nom sera systématiquement demandé à l'utilisateur.

On sélectionne une opération ou un débit en cliquant dessus avec le bouton gauche. On peut alors faire apparaître un menu avec le bouton droit, qui permet soit de décrire l'opération ou le débit (*"input"*), de les supprimer, de changer l'icône, de renommer, de déconnecter ou reconnecter un débit, etc...

On déplace une opération en restant cliqué dessus avec le bouton gauche jusqu'à faire apparaître une croix de positionnement. On peut ensuite la déplacer en glissant la souris (bouton toujours enfoncé). Chaque opération a des ports d'entrée/sortie qui doivent impérativement être connectés (ils sont indiqués *"req"*, pour *"required"*). Lorsque toutes les connexions indispensables sont faites, le message d'état passe de *"Flowsheet not Complete"* à *"Required Input not complete"* : cela signifie qu'il faut maintenant décrire les débits d'alimentation, les réglages d'opérations, etc...

FIG. 5 - Schéma de procédé dans Aspen



1.3.2 Les formulaires

Une fois le schéma de procédé complet, l'utilisateur doit indiquer :

- les constituants en présence
- les modèles et paramètres de calcul des propriétés physiques (propriétés thermodynamiques et propriétés de transport)
- la composition et les conditions des débits d'entrées
- les réglages des opérations unitaires

- le cas échéant, définir le type de calcul à faire (conditions particulières, recherche d'objectif, optimisation)
Le plus simple pour construire un cas de base permettant la simulation du procédé est de se laisser guider par la touche **N** (NEXT), dans la barre d'outils. Toutes les questions nécessaires pour construire une simulation cohérente seront posées par le logiciel.

On renseigne la simulation en remplissant des formulaires ("forms"). Un formulaire est constitué de champs à renseigner. Certains champs ne peuvent avoir que des contenus prédéterminés, que l'on peut alors sélectionner dans une liste déroulante (marquée par une flèche vers le bas).

Chaque formulaire est formé de plusieurs onglets. Les onglets qui exigent d'être complétés sont marqués par un cercle rouge; une fois complétés, ils sont cochés en bleu.

a) Formulaire "Setup"

Le premier formulaire intitulé "setup" permet essentiellement de donner un titre à la simulation, mais permet aussi de choisir les systèmes d'unités : il est fortement conseillé de choisir *SI* ou *Metric* plutôt que le système anglais (*ENG*) qui est sélectionné par défaut!

b) Les constituants

Le formulaire "*Components Specifications*" permet de définir les constituants intervenant dans le problème. Il faut fournir pour chaque molécule un "*Comp ID*", qui est un nom (souvent abrégé) choisi par l'utilisateur et l'associer à la formule brute ou au nom officiel du constituant qui permet de le retrouver dans les bases de données du logiciel. Lire l'aide en ligne pour savoir comment retrouver les noms officiels dans les bases de données.

c) Modèles de propriétés physiques

Le formulaire suivant demande de choisir les modèles de propriétés physiques (thermodynamiques et propriétés de transport). Une "méthode" est un ensemble de corrélations permettant de calculer toutes les propriétés requises de la matière considérée en fonction de la composition, la température et la pression.

Il suffit en général de compléter le champ "*Base method*". Le mieux est de choisir cette méthode de base dans la liste déroulante (commentée dans la zone d'aide contextuelle du formulaire). L'aide en ligne sur les modèles (accessible par F1) est très bien faite. On choisit dans ce cas l'équation d'état de Soave (RK-SOAVE).

Un modèle thermodynamique demande des paramètres de corps purs et des paramètres binaires. Les paramètres de corps purs sont normalement cherchés dans les bases de données du système. Les paramètres manquants peuvent être estimés par contributions de groupes, à partir de la formule développée des molécules ("*Properties / Estimation*"). Il est même possible de créer des molécules n'existant pas en base de données en entrant leur formule développée ("*Properties / Molecular-Structure*") et leurs propriétés seront estimées par contributions de groupes.

Un certain nombre de paramètres binaires de modèles sont introduits dans les bases de données, et seront utilisés par défaut. Les paramètres non disponibles seront en général mis à des valeurs par défaut (0). L'utilisateur a bien sûr intérêt à introduire des valeurs déterminées par ajustement de données expérimentales, ou à préférer, pour une première approche, des modèles de représentation des mélanges par contributions de groupes (type UNIFAC).

d) Définir les débits d'alimentation

Un débit est caractérisé par :

- sa composition : on peut fournir la composition en termes de fractions massiques, molaires ou volumiques, et indiquer le débit total (massique, molaire ou volumique). On peut aussi indiquer les débits partiels de chaque constituant (dans ce cas, le débit total sera calculé par le logiciel).

- son état : on doit fournir deux grandeurs parmi T, P, et fraction vaporisée. A noter qu'une fraction vaporisée de 0 stipule un liquide bouillant.

Il est toujours possible de choisir pour une grandeur, une unité différente du système choisi par défaut (par exemple les pressions en atm au lieu de N/SQM). La figure 8 montre comment est défini le débit d'alimentation en hydrogène. Seuls les débits d'alimentation seront demandés par le logiciel.

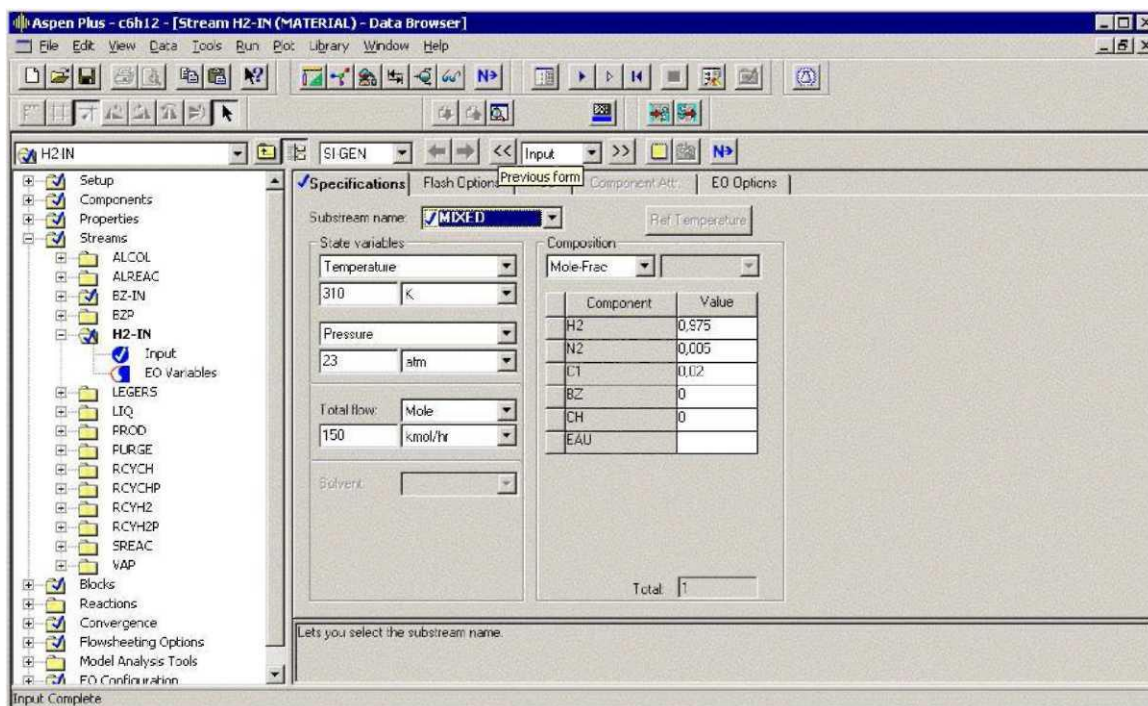


FIG. 8 – Définition du débit

Il est néanmoins possible d'initialiser les valeurs de débits internes : cela n'a d'intérêt que lorsqu'il s'agit d'un débit coupé dans une boucle de recyclage. Pour initialiser un débit, on peut le sélectionner dans le procédé, et choisir "Input" dans le menu contextuel (bouton droit).

Attention : si on commence à remplir un formulaire de débit, il faut absolument le remplir intégralement, même si c'est un débit interne qui sera de toute façon recalculé par le logiciel. On peut détruire un formulaire "Stream" à partir du browser (la liste des formulaires qui apparaît à gauche de toute fenêtre de formulaire).

e) Opérations unitaires

FIG. 9 - Définition d'un flash liquide-vapeur

Il reste à spécifier les réglages de chaque opération unitaire. Le type de renseignements à fournir dépend bien sûr de la nature de l'opération.

On donne par exemple le formulaire correspondant au séparateur haute pression (HP-SEP) en figure 9.

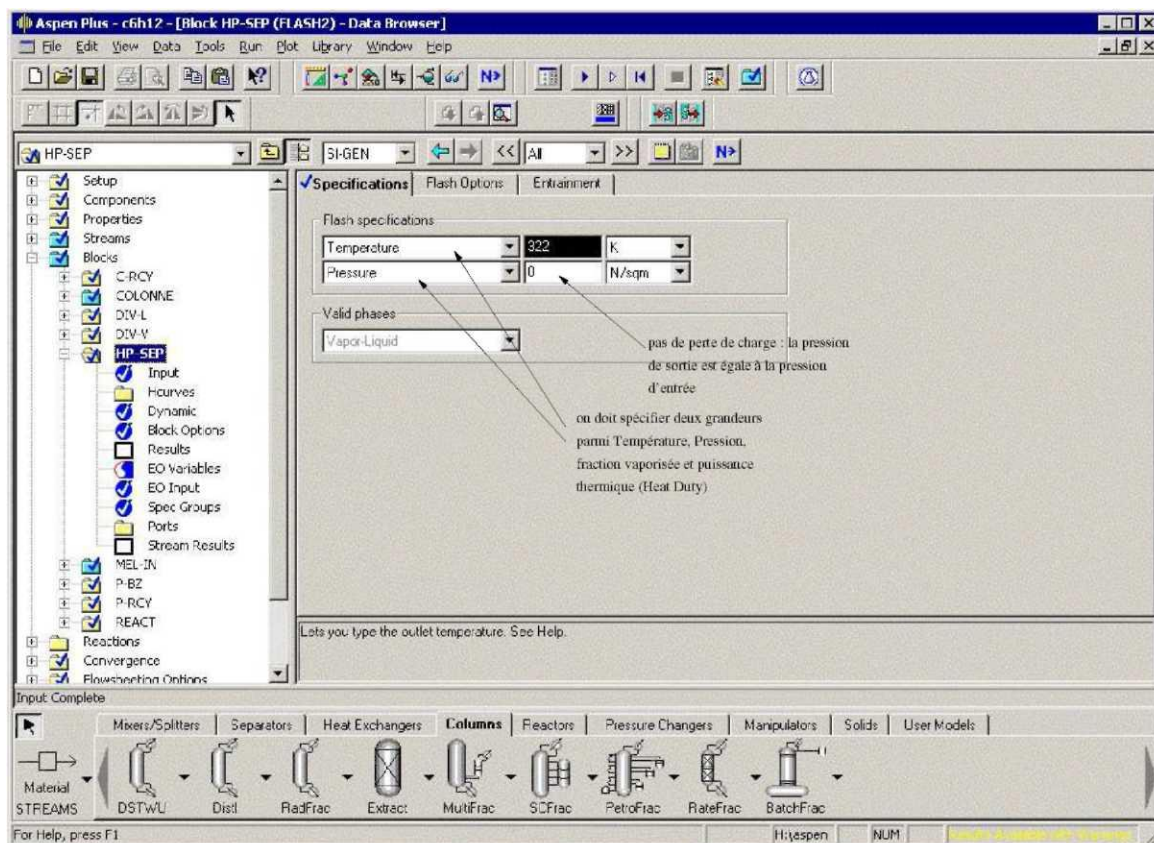
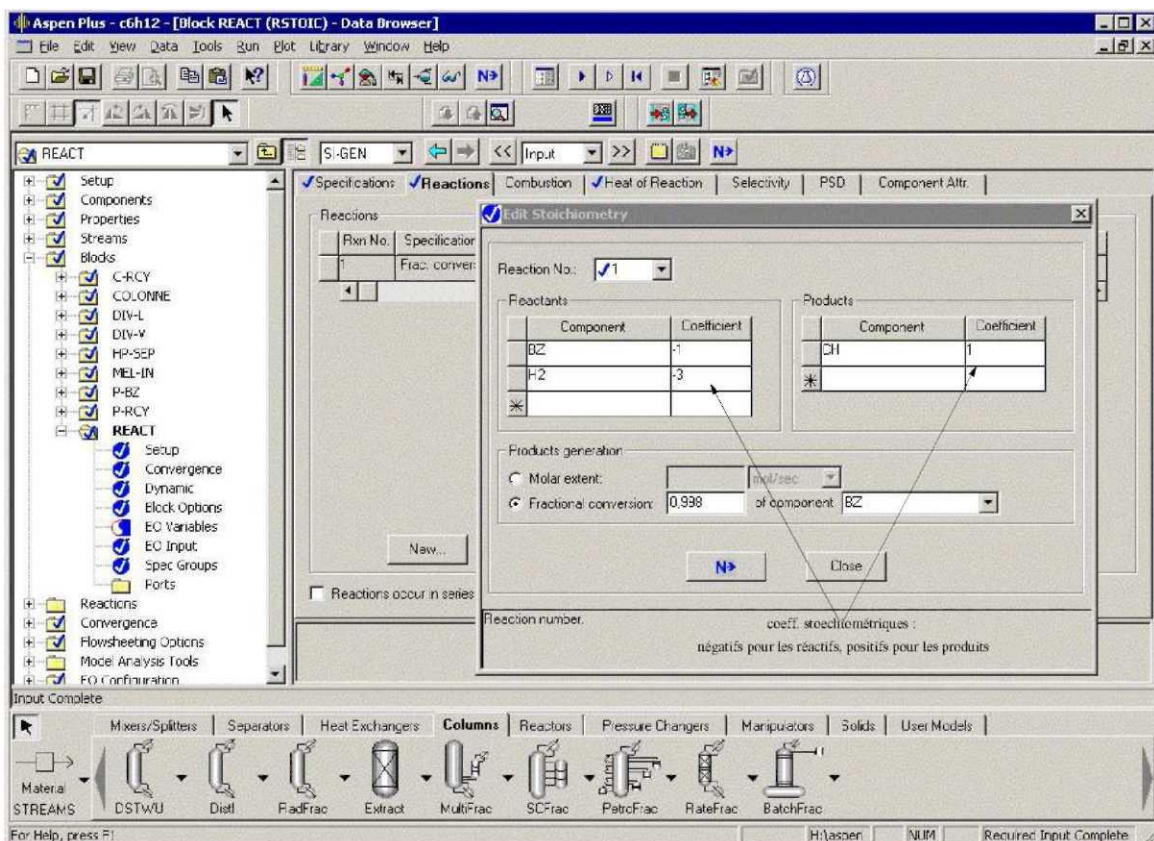


FIG. 10 – Définition d'un réacteur stœchiométrique

On remarque qu'on spécifie une pression nulle : en fait, dans Aspen, une pression négative ou nulle est interprétée comme une perte de charge entre l'entrée et la sortie de l'opération.

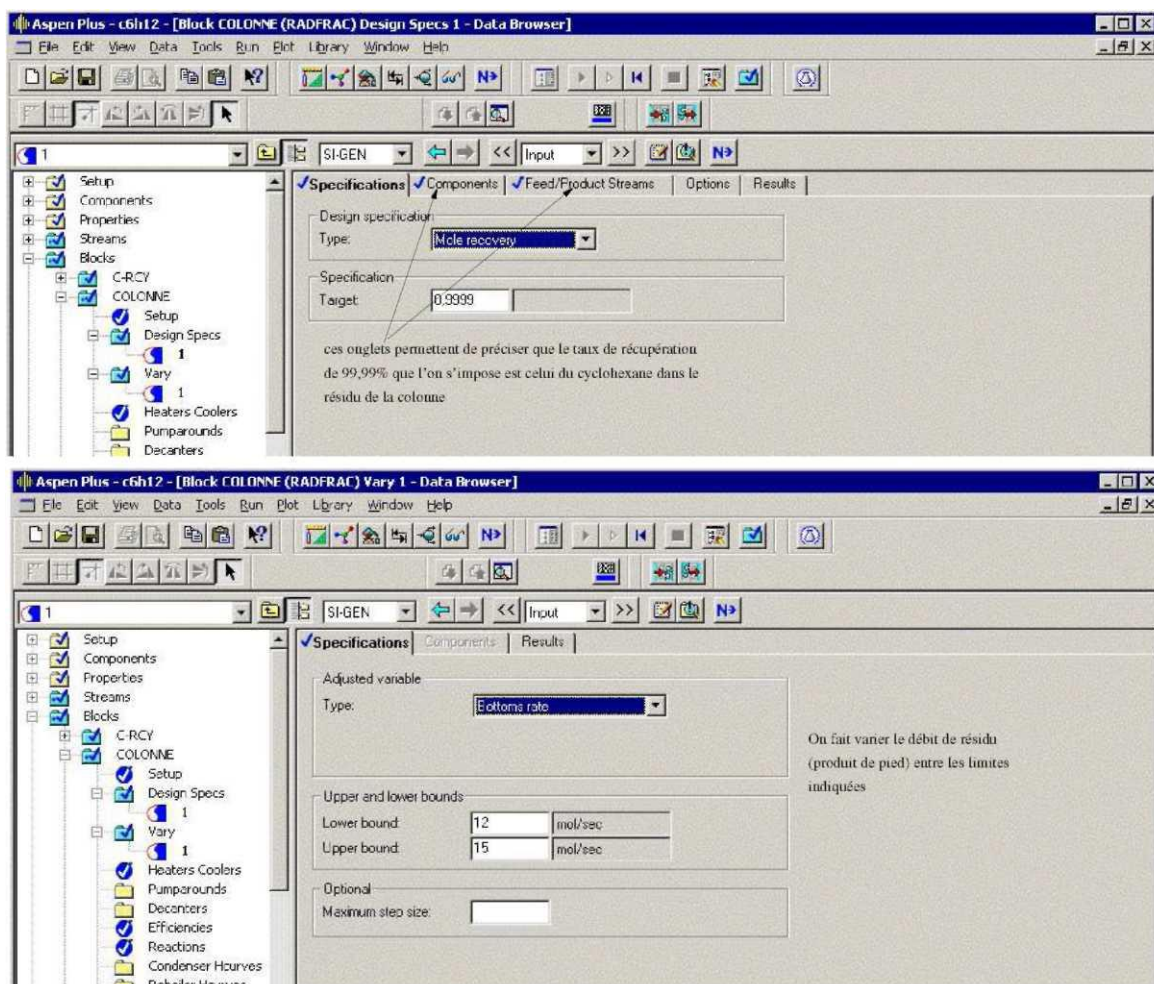
La figure 10 montre la définition du réacteur, et en particulier la façon dont est introduite la stœchiométrie de réaction.



RADFRAC est un modèle de simulation, mais on peut aussi imposer des spécifications de séparation en autorisant l'un des paramètres fixés dans les formulaires précédents à varier dans une certaine plage. La figure

14 montre comment, dans le procédé cyclohexane, on détermine le débit de résidu qui assure un taux de récupération de cyclohexane de 99,99% dans le résidu. On peut imposer autant de spécifications que l'on veut, à condition de libérer un nombre égal de variables. Il est bien plus efficace d'imposer ces spécifications à l'intérieur du calcul de la colonne, que de construire des spécifications de design (DESIGN-SPEC) externes.

FIG. 14 - Spécifications dans Radfrac



f) Introduction d'une spécification de design

Une fois toutes les opérations unitaires décrites, la simulation du procédé est possible. Le logiciel propose donc de faire la simulation, mais nous souhaitons encore spécifier la condition sur le rapport H_2/C_6H_6 à l'entrée du réacteur. On sélectionne "Data / Flowsheeting-Options / Design-Spec", on appuie sur "New" et on donne un nom à la spécification de design (ou on accepte celui proposé).

Il faut d'abord pouvoir écrire la condition. Pour cela, on associe des noms de variables à des grandeurs du procédé (onglet "define"). On décide par exemple d'appeler DEBH2 le débit d'hydrogène dans ALREAC, DEBBZ celui de benzène (figure 11, premier formulaire).

On écrit ensuite la condition (les expressions sont conformes à la syntaxe du FORTRAN), on indique la variable à manipuler (la logique est en tout point identique à celle de l'onglet "define"), et entre quelles bornes (figure 11, deuxième formulaire). Les unités des bornes ne sont pas explicites, mais c'est l'unité par défaut du système d'unités courant.

La variable à manipuler doit avoir été définie dans la simulation de base (cette valeur sera la valeur d'initialisation du processus itératif). Il suffit ensuite d'exécuter le calcul du procédé (en appuyant sur NEXT puis OK, ou en ouvrant le panneau de contrôle "Run / Control Panel". Un panneau de contrôle permet de suivre l'évolution des calculs. Il est possible d'arrêter les calculs ("Stop"), de les faire opération par opération ("Step") et de visualiser les résultats à chaque étape (figure 12)

Il suffit en fin de calcul de demander l'affichage des résultats (bouton "Results" du panneau de contrôle) pour avoir accès à l'ensemble des variables calculées (description complète des débits, des opérations unitaires (figure 13).

On peut aussi accéder directement aux résultats concernant une opération unitaire ou un débit en le sélectionnant dans le schéma et en choisissant "Results" dans le menu contextuel (bouton droit).

FIG. 11 - Spécification de design

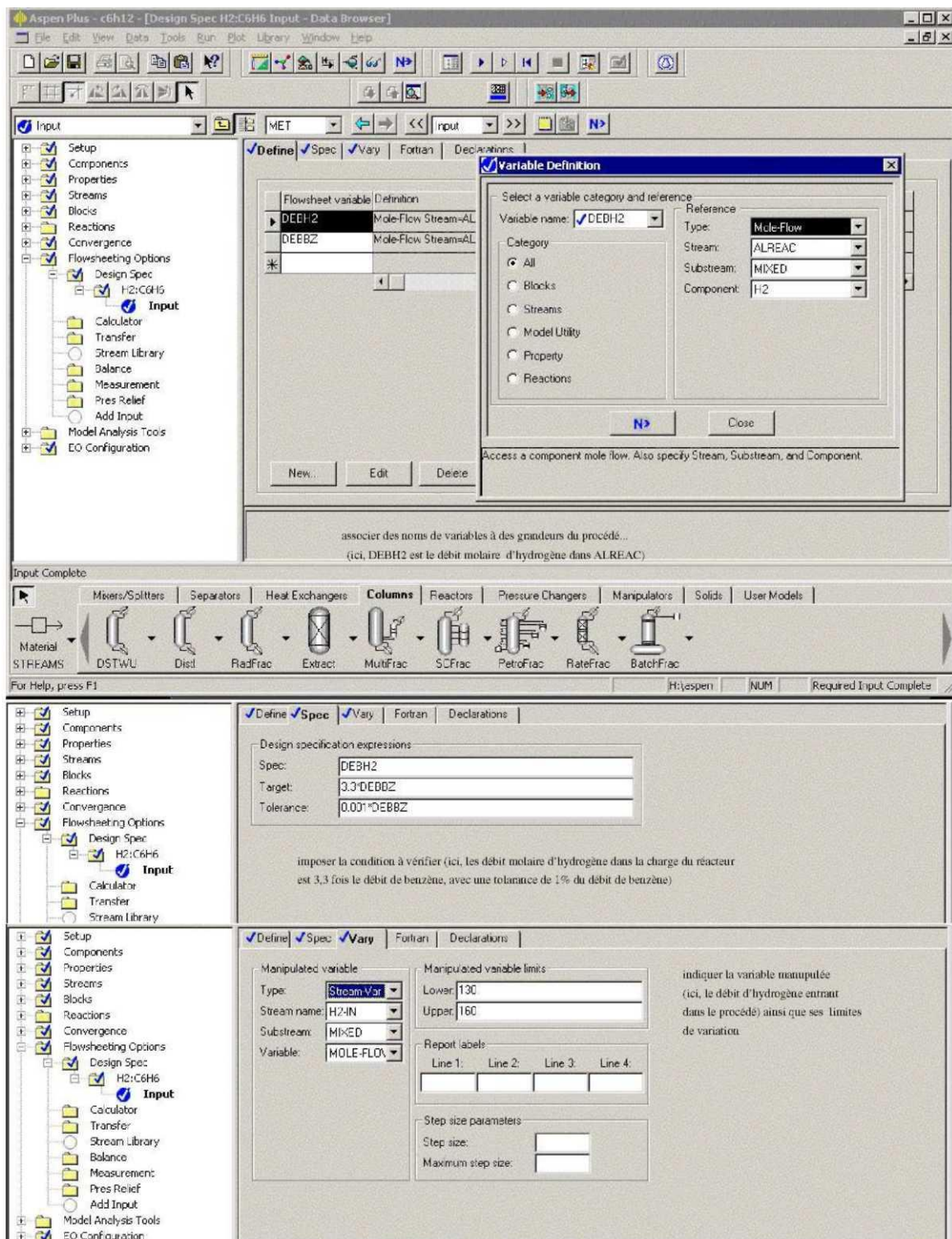


FIG. 12 - Le panneau de contrôle en cours d'exécution

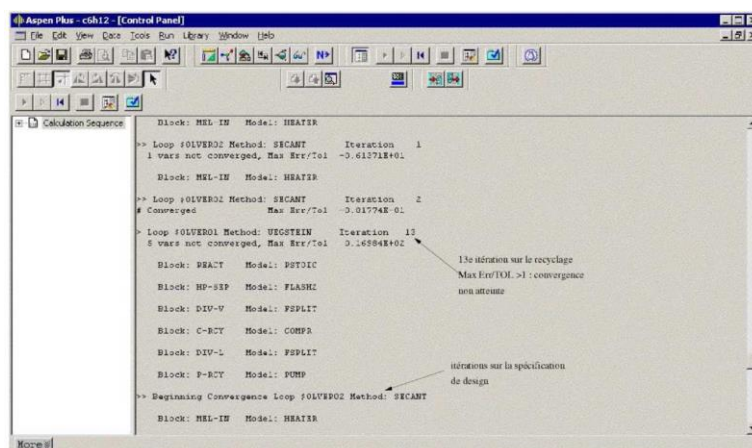


FIG. 13 - Un formulaire de résultats : les débits matériels

The screenshot shows a software window titled 'Streams' with a table of process data. The table has columns for different streams: ALCOIL, ALREAC, BZ-IN, H2-IN, H2-OUT, and LE-OUT. The rows list various process parameters such as Temperature, Pressure, Vapor Flow, Mass Flow, Molar Flow, Enthalpy, and Mass Fractions.

	ALCOIL	ALREAC	BZ-IN	H2-IN	H2-OUT	LE-OUT
Temperature K	322.0	422.0	310.0	314.2	310.0	256.8
Pressure MPa(a)	2.1987E+6	2.2287E+6	101325.000	2.3304E+6	2.3304E+6	1.3678E+6
Vapor Flow	0.000	1.000	0.000	0.000	1.000	1.000
Mass Flow mol/sec	14.410	73.889	13.889	13.889	43.888	0.541
Mass Flow kg/sec	1.176	1.648	1.005	1.005	0.104	0.009
Molar Flow kmol/sec	0.002	0.115	0.001	0.001	0.046	0.001
Enthalpy MJ/kg(a)	-1.642	0.346	0.607	0.615	-0.042	-0.029
Mass Frac.						
H2	79 PPM	0.000			0.810	0.010
N2	0.001	0.001			0.050	0.189

2. Les modes de calcul

Une simulation du procédé est possible dès que tous les degrés de liberté des opérations unitaires et des débits d'entrée sont renseignés. Mais on souhaite souvent imposer des conditions supplémentaires.

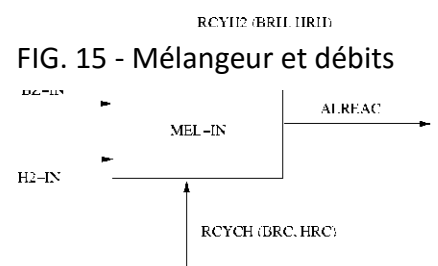
4.1 Spécification de design

Nous avons vu dans le procédé cyclohexane l'exemple de la spécification de design sur le rapport molaire H_2/C_6H_6 à l'entrée du réacteur. Imposer une spécification de design (poser une équation) demande de libérer un variable du procédé (inconnue) qui va être déterminée par résolution itérative de l'équation. La variable inconnue étant ici le débit total de H_2 -IN, l'ensemble des opérations qui séparent ce débit de celui sur lequel est imposée la condition (ici, le bloc MEL-IN) sera recalculé avec différentes hypothèses sur la valeur du débit H_2 -IN jusqu'à convergence. La façon d'introduire une spécification de design a été détaillée plus haut, nous n'y reviendrons donc pas.

4.2 Les blocs "Calculator"

Si l'on regarde de près la spécification de design décrite ci-dessus, on se rend compte qu'en fait la valeur du débit H_2 -IN peut être calculée analytiquement dès que l'on connaît les débits BZ-IN, RYH2, RYCH, qui se mélangent avec H_2 -IN pour donner ALREAC. Soient en effet (figure 15) :

- BRH, le débit partiel de benzène dans RYH2
- BRC, le débit partiel de benzène dans RYCH
- BIN, le débit partiel de benzène dans BZ-IN
- HRH, le débit partiel d'hydrogène dans RYH2
- HRC, le débit partiel d'hydrogène dans RYCH
- XH2IN, la fraction molaire d'hydrogène dans H_2 -IN



On peut calculer le débit de benzène arrivant au mélangeur : $BZTOT = BRH + BRC + BIN$.

On en déduit le débit d'hydrogène requis dans ALREAC, soit HAL : $HAL = 3.3 * BZTOT$

Or, le débit d'hydrogène recyclé, HRECY, est : $HRECY = HRH + HRC$

et il faut donc un apport net d'hydrogène H_2 IN : $H_2IN = HAL - HRECY$

Le débit total de H_2 -IN, DH2IN s'en déduit alors par : $DH2IN = H_2IN / XH2IN$

Plutôt que de faire faire un calcul itératif par une spécification de design, il est possible d'imposer directement ces relations sous la forme d'instructions de calcul qui seront exécutées systématiquement avant le calcul de MEL-IN.

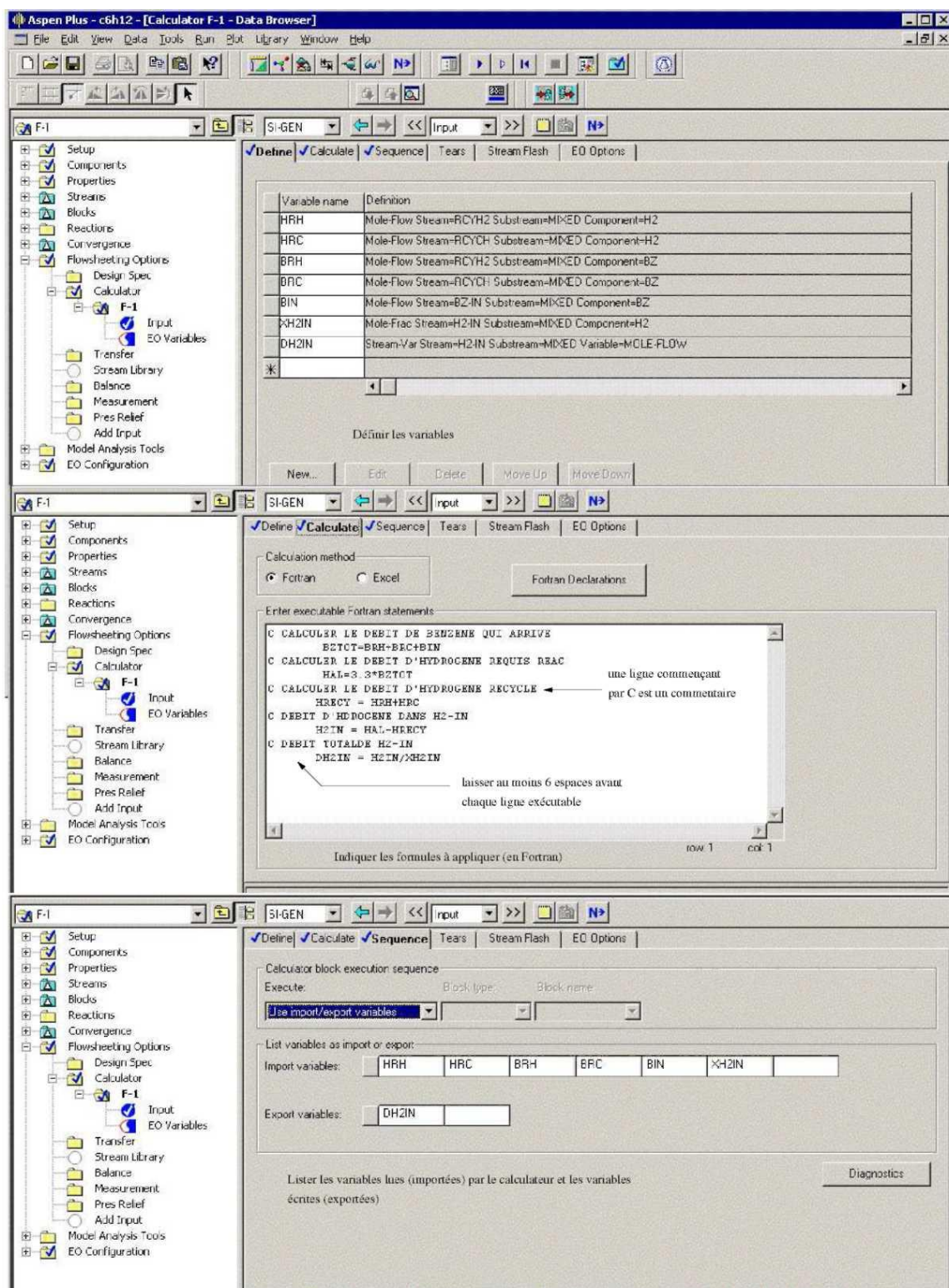
la figure 16 montre les étapes de la construction d'un bloc Fortran ("Data/Flowsheeting Options/Calculator")

- Définir les variables (les associer à des grandeurs du procédé)
- Ecrire les relations dans une syntaxe Fortran (des connaissances minimales en Fortran sont suffisantes)
- Fournir les indications permettant de savoir quand exécuter le bloc "Calculator". La méthode conseillée est de distinguer entre les variables « lues » par les instructions Fortran et les variables « écrites » par le bloc. On peut aussi demander que l'exécution se fasse avant ou après un calcul d'opération unitaire.

On notera qu'il faut aussi supprimer (ou cacher) la "design-spec" écrite précédemment pour éviter toute redondance.

Les blocs "Calculator" sont la plupart du temps d'une écriture aisée dès lors qu'une bonne analyse du procédé a été faite, et ils facilitent considérablement l'utilisation du logiciel.

FIG. 16 Un bloc Calculator



3. L'optimisation

L'optimiseur d'Aspen converge simultanément le problème de maximisation ou de minimisation de la fonction objectif, les spécifications de design et les recyclages.

Avant de passer à une optimisation, il convient de remplacer les spécifications de design existantes par des contraintes ("Data/Model Analysis Tools/Constraints"). Les formulaires "constraint" permettent d'écrire des conditions à respecter (sous forme d'égalités ou d'inégalités). A la différence des spécifications de design, il n'y a pas de variable associée à une contrainte : ces variables seront manipulées par l'optimiseur.

Pour poser un problème d'optimisation, ("Data / Model Analysis Tools / Optimization") on commence par définir la fonction à maximiser/minimiser à partir de variables du procédé : on passe donc par un formulaire "define" pour associer des variables fortran à des grandeurs procédé.

On définit ensuite l'objectif : la fonction à maximiser ou minimiser (en termes des variables déclarées dans le formulaire "define") et les contraintes associées. Il faut enfin indiquer les variables de décision, qui seront manipulées par l'optimiseur. A la différence de la spécification de design, une optimisation peut manipuler simultanément plusieurs variables.

4. Comment accéder aux grandeurs du procédé

Les blocs "Calculator", les spécifications de design, comme l'optimisation nécessitent d'associer des variables aux grandeurs du procédé, ou de définir les variables procédé à manipuler. Dans les deux cas, on accède à un paramètre procédé de la même façon, en choisissant leur type et l'opération ou le débit auquel il se rapporte :

- Si la grandeur est un débit partiel, son type est MOLE-FLOW ou MASS-FLOW. Il faut ensuite préciser le débit et le constituant concerné.
- On accède de la même façon à une fraction molaire (MOLE-FRAC) ou massique (MASS-FRAC) d'un constituant dans un débit.
- Si la grandeur est une variable globale associée à un débit (température, pression, débit total) son type est STREAM-VAR. Il faut ensuite indiquer le débit et la variable concernée (par exemple, TEMP, PRES, MOLE-FLOW)
- Si la grandeur est associée à une opération, son type est BLOCK-VAR. Il faut ensuite préciser l'opération et la variable concernée.

Tous les mots-clés peuvent être choisis dans des listes défilantes (bouton droit), et l'explication de chaque choix est donnée dans la ligne d'aide contextuelle.

Attention : lorsque vous accédez à une variable du procédé, l'unité dans laquelle cette variable est renvoyée est l'unité par défaut du système d'unités actif dans la fenêtre DEFINE. Il est fortement conseillé d'utiliser le SI par défaut.

5. Manipulations

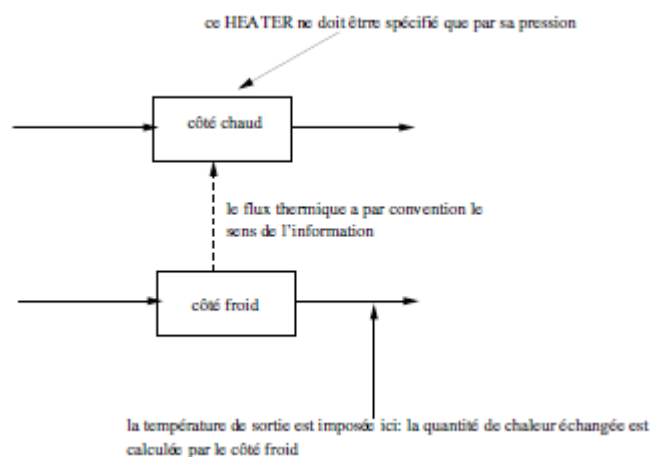
a) Les débits de chaleur

La plupart des modèles d'opération possèdent aussi des ports d'entrée-sortie pour des débits de chaleur ("HEAT-STREAM"). Ces débits peuvent être très utiles dans certaines situations, comme la modélisation simple d'échangeurs de chaleur. Un échangeur de chaleur peut être vu comme deux blocks "HEATER", correspondant à chacun des deux côtés (calandre et tubes pour un échangeur tubulaire), couplés thermiquement (la chaleur cédée par le côté chaud est exactement celle reçue par le côté froid). On ne peut donc s'imposer que l'une des températures de sortie, par exemple du côté froid. On peut donc modéliser un échangeur comme deux HEATERS reliés par un débit de chaleur. Le sens de ce débit est celui de l'information: si la quantité de chaleur est calculée par le HEATER correspondant au côté froid de l'échangeur, on dirigera le flux de chaleur du côté froid vers le côté chaud (il aura donc une valeur négative) (figure 17).

Cette façon de représenter les échangeurs évite souvent de faire apparaître une boucle de recyclage supplémentaire dans les calculs, et simplifie donc la convergence. Par rapport à une modélisation complète sous la forme d'un échangeur de chaleur (modèle HEATX), on perd toute information sur le dimensionnement (surface d'échange), mais ces calculs peuvent être faits lors de l'évaluation économique du procédé.

b) Courbes thermodynamiques

FIG. 17 Utilisation d'un débit de



Un certain nombre de propriétés de corps purs (PL= pression de saturation, DHVL=enthalpie de vaporisation, etc...) peuvent être tabulées et tracées en fonction de la température ("*Tools/Analysis/Property/Pure*").

On peut aussi obtenir les lentilles d'équilibre binaires (isothermes ou isobares) dans le menu ("*Tools/Analysis/Property/Binary*").

c) Convergence

Il est souvent utile d'aider à la convergence des recyclages lorsque l'on dispose d'une bonne initialisation d'un débit interne à la boucle. Il suffit de spécifier ce débit comme débit coupé ("*Data/Convergence/Tear*"). Pour initialiser le débit, le sélectionner, puis choisir Input dans le menu contextuel. Si l'utilisateur ne spécifie pas assez de courants coupés pour ouvrir au moins chaque boucle une fois, le logiciel complètera automatiquement la liste des courants coupés.

Si le processus de convergence d'un recyclage s'arrête parce que le nombre maximum d'itérations est atteint, il est possible d'augmenter le nombre d'itérations autorisées. Pour ce faire, aller dans "*Data/Convergence/Convergence options*". Dans le "browser" de droite, choisir d'abord Defaults, onglet "Default methods" et vérifier quelle est la méthode numérique utilisée pour converger les courants coupés ("*Tears*"), normalement la méthode de "*Wegstein*". Puis choisir la rubrique Methods dans le browser, choisir l'onglet correspondant à la méthode numérique concernée, et fixer le nombre maximal d'itérations.

d) Réinitialisation

D'une exécution à l'autre, les calculs sont normalement réinitialisés sur le résultat de la simulation précédente. Si des paramètres importants ont été changés par l'utilisateur, il est possible que cette initialisation ne convienne plus, et emmène le logiciel très loin de la convergence attendue. Dans ce cas, il est conseillé de réinitialiser "à zéro" tous les calculs ("*Run / Reinitialize*").

e) Analyse de sensibilité

Il peut être utile de faire une analyse de sensibilité sur un procédé : on pourrait, par exemple, dans le procédé cyclohexane, souhaiter savoir comment varie la composition en impuretés (azote et méthane) de la charge du réacteur en fonction du taux de purge vapeur. On demande une analyse de sensibilité dans "*Data/Model Analysis Tools/Sensitivity*" : on définit les grandeurs à calculer (Onglet "define"), les variables et les valeurs à leur donner, enfin les tableaux à construire. L'approche est très similaire à la spécification de design.

f) Les courbes

De nombreux formulaires de résultats permettent de tracer des courbes en choisissant une colonne de données pour l'axe des x et plusieurs autres colonnes pour l'axe des y. Voir le menu "Plot" du formulaire.

g) Fichier de résultats complets

Il est souvent utile de disposer d'un fichier de résultats complets, que l'on peut imprimer pour l'analyser en détail. Pour ce faire : "*File/Export*", sélectionner "report" et donner un nom. Un fichier ASCII portant ce nom avec l'extension .rep sera créé.

h) Sauvegardes

La construction d'un modèle est un travail souvent long et ardu... et il arrive que le logiciel plante ! Le plus souvent, il sera possible de recharger l'état antérieur, mais ce n'est pas systématique. Des sauvegardes régulières permettront de minimiser les risques.